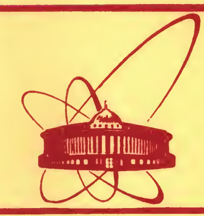


объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P17-81-630

Ф.Кристоф, А.Л.Куземский

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ В МОДЕЛИ ПЕРЕХОДНОГО МЕТАЛЛА С НЕСФЕРИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ ФЕРМИ

Направлено в "physica status solidi" (b) 111, K1 (1982)

1981

1. ВВЕДЕНИЕ

При исследовании электросопротивления переходных металлов и их соединений обнаруживается целый ряд особенностей, которые находятся в тесной связи со сложным видом законов дисперсии квазичастиц, участвующих в процессах переноса, и с особой ролью d-электронов [1-12]. Температурное поведение электросопротивления при низких температурах имеет более сложный характер, чем закон Блоха-Грюнайзена. Для некоторых переходных металлов, в частности для ферромагнитных, не всегда удается однозначно установить механизм рассеяния, приводящий к той или иной температурной зависимости [1-5,12]. Отчасти это связано с тем, что в теории характер температурной зависимости определяется принятой моделью металла и теми приближениями, которые делаются при расчете электросопротивления [12]. Например, для неферромагнитных переходных металлов зависимость T^2 обычно связывается с бейберовским рассеянием почти свободных электронов [1-5]. Для ферромагнитных переходных металлов зависимость T^2 может возникать вследствие электрон-магнонного рассеяния [1,4,12].

Важным механизмом рассеяния является электрон-фононное взаимодействие. Поэтому в последние годы большой интерес вызывает исследование кинетических свойств переходных металлов и их соединений на основе модели Хаббарда [13] с учетом электрон-фононного взаимодействия [14-17]. Несмотря на известный схематизм, модель Хаббарда [13] позволяет учесть основную часть электрон-электронного взаимодействия и описать целый ряд магнитных, электрических и оптических свойств переходных металлов и их соединений.

Обычно для учета электрон-фононного взаимодействия в модели Хаббарда используется гамильтониан Фрелиха /см., например, [17] /. Такой подход имеет ряд трудностей [18]; в частности для переходных металлов нелегко оценивать матричный элемент электрон-фононного взаимодействия [12].

В настоящей работе для оценки вклада электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий в низкотемпературное поведение электропроводности мы воспользуемся однозонной моделью переходного металла, предложенной Барисичем-Лаббе-Фриделем [19]. Эта модель /БЛФ/ представляет собой прямое обобщение гамильтониана Хаббарда для случая колеблющейся решетки. Для вычисления электропроводности используется последовательный метод,

развитый в [20]. Подход [20] исходит из первых принципов и связан с использованием метода неравновесного статистического оператора [21,23]. При этом выводятся обобщенные кинетические уравнения, содержащие обобщенные интегралы столкновений, записанные через корреляционные функции. В зонном пределе для модели БЛФ на основе полученных обобщенных кинетических уравнений удается записать электросопротивление через характерные параметры электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействия для переходного металла. При низких температурах найдена зависимость электросопротивления от температуры при учете сдвига центра тяжести и деформации поверхности Ферми.

2. ОБОБЩЕННЫЕ КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ

Метод вычисления электросопротивления квантовомеханической системы многих тел, которая описывается неравновесным статистические оператором /НСО/ ρ_s, состоит в следующем [20,21]. Оператор ρ_s удовлетворяет уравнению движения

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + i[H_s, \rho_s] = -\eta(\rho_s - \rho_q), \qquad /1/$$

где $H_s = H + H_E$ - полный гамильтониан системы, включающий оператор взаимодействия с внешним электрическим полем $H_E = -e\vec{E}\sum_i \vec{r}_i$, а ρ_q - квазиравновесный статистический оператор. Из /1/ следует, что для того, чтобы построить НСО, рассматриваются бесконечно малые возмущения /или источники/, нарушающие симметрию уравнения Лиувилля относительно обращения времени. Эти источники устремляются к нулю после термодинамического предельного перехода при вычислении средних [20,21].

Конкретное нахождение НСО связано с известной концепцией Н.Н.Боголюбова[22] иерархии времен релаксации, согласно которой предполагается, что в процессе временной эволюции неравновесного процесса происходит сокращение в описании. Таким образом, если для описания неравновесного состояния системы достаточно сокращенного набора средних значений некоторых операторов P_m или сопряженных им параметров $F_m(t)$, то можно найти такое частное решение уравнения Лиувилля, которое зависит от времени лишь через $F_m(t)$. При этом квазиравновесный статистический оператор

$$\rho_q = \exp\{-\Phi(t) - \beta(H + \sum_m P_m F_m(t))\}, \qquad /2/$$

где

$$\Phi(t) = \operatorname{Ln} \operatorname{Sp} \exp\{-\beta(H + \sum_m F_m(t) P_m(0))\} \qquad /3/$$

- функционал Масье-Планка.

Решение уравнения Лиувилля с источниками /1/ имеет вид:

$$\rho_s = \rho_q - i\int_{-\infty}^{0} dt\, e^{\eta t} e^{iH_s t}\,[H_s,\rho_q]\,e^{-iH_s t} \; . \qquad /4/$$

Величина $\eta \to 0^+$ после термодинамического предельного перехода при вычислении средних. Таким образом, для конкретного вида гамильтониана H_s вид НСО задается выбором ρ_q.

Неизвестные параметры F_m находятся из условий равенства средних значений операторов F_m по квазиравновесному распределению ρ_q их средним значениям по неравновесному распределению ρ_s, т.е.

$$\langle P_m\rangle_q = Sp\{\rho_q P_m\} = Sp\{\rho_s P_m\} = \langle P_m\rangle \; . \qquad /5/$$

Условие /5/ эквивалентно условию стационарности для средних значений операторов

$$\frac{d}{dt}\langle P_m\rangle = 0 \quad \text{или} \quad \langle[H_s,P_m]\rangle + \langle[H_E,P_m]\rangle = 0\, . \qquad /6/$$

Разложим теперь операторы ρ_s и ρ_q в /5/ в ряд по степеням внешнего электрического поля $\vec{E}$ и параметрам F_m. Ограничимся при этом только первым порядком /линейный отклик/. В результате получим из /6/ следующую систему уравнений

$$\sum_n F_n\{\frac{1}{i}Sp\{\rho\,[P_n,P_m]\} + \langle\dot{P}_n;\dot{P}_m\rangle\} = -\frac{eE}{n}\{Sp\{\rho\,\vec{P}_e\,(-i\lambda)\,P_m\} + \langle\dot{\vec{P}}_e;\dot{P}_m\rangle\}, \qquad /7/$$

где

$$\dot{P}_m = i[H_s,P_m], \qquad /8/$$

$$\langle A;B\rangle = \int_{-\infty}^{0} dt\, e^{\eta t}\int_0^{\beta} d\lambda\, Sp\{\rho A(t-i\lambda)B\}, \qquad /9/$$

$$A(t) = \exp(iHt)\,A\,\exp(-iHt); \quad \rho = Z^{-1}\exp(-\beta H)\; .$$

Величина $\vec{P}_e$ в /7/ есть полный импульс электронов.

Уравнения /7/ являются обобщенными кинетическими уравнениями, содержащими обобщенные интегралы столкновений в виде корреляционных функций. Можно показать, что уравнения /7/ содержат формулу Кубо как частный случай, если $\vec{P}_e$ выражается в виде

$\vec{P}_e = \sum_i \vec{\alpha}_i P_i$ /см. Приложение/. Решение кинетических уравнений /7/ и определение параметров F_m может быть проведено на основе вариационного принципа[23-25].

Плотность электрического тока определим в виде

$$\vec{j} = \frac{e}{m\Omega} Sp\{\rho_s \vec{P}_e\} = \frac{e}{m\Omega} Sp\{\rho_q \vec{P}_e\} , \qquad /10/$$

где Ω - полный объем системы. В /10/ использовано условие /5/. После линеаризации /10/ по параметрам F_m, получим

$$\vec{j} = \frac{e}{3m\Omega} \sum_m F_m \int_0^\beta d\lambda\, Sp\{\rho P_m(-i\lambda) \vec{P}_e\} = \frac{1}{R} \vec{E} . \qquad /11/$$

Здесь принято во внимание то, что F_m пропорциональны внешнему электрическому полю $\vec{E}$.

В настоящей работе при вычислении электросопротивления R будем рассматривать модель переходного металла с одной несферической поверхностью Ферми. Под действием электрического поля происходит сдвиг центра тяжести и деформация в k-пространстве. В результате уравнение для поверхности Ферми $E(\vec{k}) = \epsilon_f$ преобразуется: $\tilde{E}(\vec{k}) = \epsilon_f$, где

$$\tilde{E}(\vec{k}) = E(\vec{k}) + m\vec{v}_1 \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} + m \sum_{i=2}^{n} \vec{v}_i \Phi^i(\vec{k}) \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} + \ldots \qquad /12/$$

Величина $\vec{v}_1$ описывает однородный сдвиг всех электронов как целого в $\vec{k}$-пространстве, а последний член в /12/ описывает деформацию поверхности Ферми под действием электрического поля. Полиномы $\Phi^i(\vec{k})$ выбираются в соответствии с симметрией кристалла[26-30]. В рассматриваемой в данной работе однозонной модели переходного металла выполняется условие периодичности с вектором обратной решетки $\vec{C}$

$\tilde{E}(\vec{k} + \vec{C}) = \tilde{E}(\vec{k})$.

Поэтому полиномы $\Phi^i(k)$ также удовлетворяют следующему условию периодичности:

$$\Phi^i(\vec{k} + \vec{C}) = \Phi^i(\vec{k}) . \qquad /13/$$

Возьмем, с учетом /12/, в качестве набора операторов P_m операторы импульса:

$$\vec{P}_e = \vec{P}_1 = m \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} a^+_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} ,$$

$$\vec{P}_i = m \sum_{\vec{k}\sigma} \Phi^i(\vec{k}) \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} a^+_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} \qquad (i = 2, \ldots, n). \qquad /14/$$

При этом параметры F_m соответствуют обобщенным скоростям переноса электронов $\vec{v}_1$ и $\vec{v}_i$. Операторы $a^+_{\vec{k}\sigma}$ и $a_{\vec{k}\sigma}$ являются операторами рождения и уничтожения электронов в блоховском состоянии $(\vec{k}\sigma)$. С учетом /14/ квазиравновесный статистический оператор /2/ запишется в виде

$$\rho_q = \frac{1}{Z_q}[-\beta(H + m\vec{v}_1 \sum_{\vec{k}\sigma} \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} a^+_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} + \sum_{i=2}^{n} m\vec{v}_i \sum_{\vec{k}\sigma} \Phi^i(\vec{k}) \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} a^+_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma})]. \quad /15/$$

Таким образом, возникающее во внешнем электрическом поле неравновесное распределение электронов /15/ неизотропно и имеет специфические энергетическую и угловую зависимости.

Заметим, что при получении квазиравновесного распределения в виде /15/ не учитывались процессы увлечения фононов вследствие взаимодействия фононов с движущимися электронами. Предполагается, что фононная система успевает прийти в равновесие за счет фонон-фононных столкновений с перебросом или за счет взаимодействий с другими квазичастицами. Для учета процессов увлечения фононов в операторе /15/ необходимо учесть член вида $\vec{v}_{ph} \cdot \vec{P}_{ph}$, где $\vec{v}_{ph}$ - средняя дрейфовая скорость фононов и $\vec{P}_{ph}$ - полный импульс фононов. В настоящей работе поправки, связанные с неравновесностью фононной системы, не учитываются. Рассматриваемый метод построения обобщенных кинетических уравнений допускает также непосредственное обобщение для многозонных металлов.

3. ГАМИЛЬТОНИАН МОДЕЛИ ПЕРЕХОДНОГО МЕТАЛЛА

Рассмотрим в однозонном приближении систему сильно связанных d-электронов, описываемую гамильтонианом Хаббарда [13]:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} a^+_{i\sigma} a_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma},$$

где $a^+_{i\sigma}$, $a_{i\sigma}$ - операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии Ванье, центрированном на узле i, $n_{i\sigma} = a^+_{i\sigma} a_{i\sigma}$; U - энергия кулоновского отталкивания электронов с противоположными спинами на одном узле и $t_{ij} = N^{-1} \sum_k E(\vec{k}) \exp[i\vec{k}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)]$ - интеграл перескока; $E(\vec{k}) = 2\sum_a t(\vec{a}_a) \cos(\vec{k}\cdot\vec{a}_a)$ - закон дисперсии сильно связанных электронов.

Рассмотрим теперь, следуя [19,31], влияние малых колебаний ионов относительно равновесных положений на электронную подсистему металла с гамильтонианом /13/. В зонном представлении получим:

$$H = H^\circ_e + H_{ee} + H_{ep}, \quad /16/$$

где

$$H^{\circ}_{e} = \sum_{\vec{k}\sigma} E(\vec{k})\, a^{+}_{\vec{k}\sigma} a_{\vec{k}\sigma} ,$$

$$H_{ee} = \frac{U}{N} \sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2} \sum_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{G}} a^{+}_{\vec{k}_1\uparrow} a_{\vec{k}_2\uparrow} a^{+}_{\vec{k}_3\downarrow} a_{\vec{k}_4\downarrow} \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 + \vec{k}_3 - \vec{k}_4 + \vec{C}), \qquad /17/$$

$$H_{ep} = \sum_{\vec{k}\vec{k}_1} \sum_{\vec{q}\vec{G}\sigma\nu} g^{\nu}_{\vec{k}\vec{k}_1} a^{+}_{\vec{k}_1\sigma} a_{\vec{k}\sigma} (b_{\vec{q}\nu} + b^{+}_{-\vec{q}\nu})\, \delta(\vec{k}_1 - \vec{k} - \vec{q} + \vec{G}), \qquad /18/$$

где $\vec{G}$ - вектор обратной решетки. Здесь введены обозначения:

$$g^{\nu}_{\vec{k}\vec{k}_1} = \left(\frac{1}{2NM\,\omega^{\circ}(\vec{k}_1\nu)}\right)^{1/2} I^{\nu}_{\vec{k}\vec{k}_1} , \qquad /19/$$

$$I^{\nu}_{\vec{k}\vec{k}_1} = 2iq_0 \sum_{a} t(\vec{a}_a) \frac{\vec{a}_a \cdot \vec{e}_{\nu}(\vec{k}_1)}{a_a} (\sin \vec{k}_a \vec{a}_a - \sin \vec{k}_{1a} \vec{a}_a), \qquad /20/$$

где N - число атомов в решетке, M - масса иона, $\vec{e}_{\nu}(\vec{k})$ - векторы поляризации фононов $(\nu = 1, 2, 3)$, $\omega^{\circ}(k\nu)$ - частоты фононов без учета d-электронов. Величина $t(\vec{a}_a)$ - интеграл перескока между ближайшими соседями, лежащими на оси $\vec{a}_a$; q_0 - слейтеровский коэффициент, характеризующий экспоненциальное убывание радиальной части волновой функции сильно связанного электрона /19/. Фононную подсистему описываем оператором гармонических фононов

$$H_p = \sum_{\vec{q}\nu} \omega^{\circ}(\vec{q}\nu)(b^{+}_{\vec{q}\nu} b_{\vec{q}\nu} + \frac{1}{2}) . \qquad /21/$$

Полный гамильтониан электрон-ионной модели переходного металла БЛФ /16/ является суммой операторов /17/, /18/ и /21/. Обсуждение применимости гамильтониана БЛФ содержится в работах /19,31/. Таким образом, в модели переходного металла БЛФ s-электроны явно не учитываются. Вместо двух зон s(p)- и d-электронов рассматривается одна "эффективная" зона электронов, взаимодействующих с фононами. Однако косвенно влияние s-электронов учтено. Считается, что все три ветви колебаний $\omega^{\circ}(\vec{k}\nu)$ соответствуют акустическим частотам /18/, а величина кулоновского отталкивания U перенормирована за счет экранировки s-электронами.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ В МОДЕЛИ БЛФ

Применим теперь общий метод вычисления электросопротивления, описанный в разделе 2, для модели БЛФ /16/. Учитывая явный вид

операторов H_{ee} и H_{ep}, представим операторы производных $\dot{P}_n$, т.е. обобщенных сил P_n в следующем виде:

$$\dot{P}_n \to \dot{\vec{P}}_j = \dot{\vec{P}}_j^{ee} + \dot{\vec{P}}_j^{ep}, \qquad /22/$$

$$\dot{\vec{P}}_j^{ee} = \frac{iU\pi}{N}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\sum_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{G}}(\Phi^j(\vec{k}_4)\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_4} + \Phi^j(\vec{k}_2)\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_2} - \Phi^j(\vec{k}_3)\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_3} - \Phi^j(\vec{k}_1)\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_1}) \times$$

$$\times a^+_{\vec{k}_1\uparrow} a_{\vec{k}_2\uparrow} a^+_{\vec{k}_3\downarrow} a_{\vec{k}_4\downarrow}\delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 + \vec{k}_3 - \vec{k}_4 + \vec{G}) . \qquad /23/$$

$$\dot{\vec{P}}_j^{ep} = \pi\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\sum_{\vec{q}\vec{G}}\sum_{\sigma\nu} g^{\nu}_{\vec{k}_1\vec{k}_2}(\Phi^j(\vec{k}_2)\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_2} - \Phi^j(\vec{k}_1)\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_1}) \times \qquad /24/$$

$$\times a^+_{\vec{k}_2\sigma} a_{\vec{k}_1\sigma}(b_{\vec{q}\nu} + b^+_{-\vec{q}\nu})\delta(\vec{k}_2 - \vec{k}_1 - \vec{q} + \vec{G}) .$$

Подставим /22/, /23/ и /24/ в уравнение /7/. Корреляционные функции $\langle \dot{P}_j ; \dot{P}_i \rangle$ вычислим в пределе слабого взаимодействия электронов между собой и с фононами. Временную эволюцию будем описывать в нулевом приближении $A(t) = A_0(t) = \exp[i(H_e + H_p)t] A \times \exp[-i(H_e + H_p)t]$. Применяя теорему Вика, найдем, что корреляционная функция $\langle \dot{P}_j ; \dot{P}_i \rangle$ равна

$$\langle \dot{P}_j ; \dot{P}_i \rangle = \langle \dot{P}_j^{ee} ; \dot{P}_i^{ee} \rangle + \langle \dot{P}_j^{ep} ; \dot{P}_i^{ep} \rangle . \qquad /25/$$

Для кубических систем /25/ запишется в виде

$$\langle \dot{\vec{P}}_j^{ee} ; \dot{\vec{P}}_i^{ee} \rangle = \frac{U^2\pi^2\beta\pi}{N^2}\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\sum_{\vec{k}_3\vec{k}_4\vec{G}} A_j(\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4) A_i(\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4) \times$$

$$\times f_{\vec{k}_1}(1 - f_{\vec{k}_2}) f_{\vec{k}_3}(1 - f_{\vec{k}_4})\delta(E(\vec{k}_1) - E(\vec{k}_2) + E(\vec{k}_3) - E(\vec{k}_4))\delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2 + \vec{k}_3 - \vec{k}_4 + \vec{G}), \qquad /26/$$

$$\langle \dot{\vec{P}}_j^{ep} ; \dot{\vec{P}}_i^{ep} \rangle = 2\pi\pi^2\beta\sum_{\vec{k}_1\vec{k}_2}\sum_{\vec{q}\vec{G}\nu}(g^{\nu}_{\vec{k}_1\vec{k}_2})^2 B_j(\vec{k}_1,\vec{k}_2) B_i(\vec{k}_1,\vec{k}_2) \times$$

$$\times f_{\vec{k}_2}(1 - f_{\vec{k}_1}) N(\vec{q}\nu)\delta(E(\vec{k}_2) - E(\vec{k}_1) + \omega^{\circ}(\vec{q}\nu))\delta(\vec{k}_2 - \vec{k}_1 - \vec{q} + \vec{G}) . \qquad /27/$$

Здесь введены обозначения:

$$A_i(\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_4) = \Phi^i(\vec{k}_4)\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_4} - \Phi^i(\vec{k}_3)\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_3} + \Phi^i(\vec{k}_2)\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_2} - \Phi^i(\vec{k}_1)\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_1},$$

$$B_i(\vec{k}_1,\vec{k}_2) = \Phi^i(\vec{k}_2)\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_2} - \Phi^i(\vec{k}_1)\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_1}, \qquad /28/$$

$$f(E(\vec{k})) = f_k = [\exp\beta(E(\vec{k}) - \epsilon_f) + 1]^{-1} ,$$
$$N(\omega^\circ(\vec{q}\nu)) = N(\vec{q}\nu) = [\exp\beta\omega^\circ(\vec{q}\nu) - 1]^{-1} . \qquad /29/$$

Заметим, что в использованном приближении корреляционные функции $<\dot{\vec{P}}_1;\dot{\vec{P}}_i>$ исчезают.

Обобщенные средние числа электронов в /7/ задаются следующим выражением:

$$N_i = \frac{1}{m} Sp\{\rho \vec{P}_1(i\lambda)\vec{P}_i\} = m\beta \sum_{\vec{k}} \Phi^i(\vec{k}) \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} f_{\vec{k}}(1 - f_{\vec{k}}) . \qquad /30/$$

Таким образом, все необходимые для вычисления электросопротивления величины записаны через параметры гамильтониана БЛФ. Уравнение /7/ определяет параметры $\vec{v}_1$ и $\vec{v}_j$,что, в свою очередь, определяет плотность тока и электросопротивление /11/.

5. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ

На основе общих выражений /26/ и /27/ найдем вклад в температурную зависимость электросопротивления при низких температурах от электрон-электронного и электрон-ионного взаимодействия. Величины N_i при $T \to 0$ практически не зависят от температуры, поскольку $\beta f_{\vec{k}}(1 - f_{\vec{k}}) \to \delta(E(\vec{k}) - \epsilon_f)$. Поэтому для отыскания температурной зависимости электросопротивления необходимо исследовать температурное поведение корреляционных функций /26/ и /27/ при низких температурах.

Рассмотрим сначала вклад от электрон-электронного взаимодействия

$$<\dot{\vec{P}}_j^{ee} ; \dot{\vec{P}}_i^{ee}> = \beta \iiint_0^{E_{max}} dE(\vec{k}_1)dE(\vec{k}_2)dE(\vec{k}_3)\, F^1_{ji}(E(\vec{k}_1), E(\vec{k}_2), E(\vec{k}_3)) \times$$
$$\times f_{\vec{k}_1}(1 - f_{\vec{k}_2}) f_{\vec{k}_3}(1 - f(E(\vec{k}_1) - E(\vec{k}_2) + E(\vec{k}_3))) , \qquad /31/$$

где

$$F^1_{ji}(E(\vec{k}_1), E(\vec{k}_2), E(\vec{k}_3)) = \frac{\pi m^2 U^2}{N^2} \frac{\Omega^3}{(2\pi)^9} \sum_{\vec{G}} \int d^2S_1 \int d^2S_2 \int d^2S_3 \times$$
$$\times \frac{A_j(\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_1-\vec{k}_2+\vec{k}_3+\vec{C}) A_i(\vec{k}_1,\vec{k}_2,\vec{k}_3,\vec{k}_1-\vec{k}_2+\vec{k}_3+\vec{C})}{\left|\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_1}\right| \left|\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_2}\right| \left|\frac{\partial E}{\partial \vec{k}_3}\right|} \times \qquad /32/$$
$$\times \delta(E(\vec{k}_1) - E(\vec{k}_2) + E(\vec{k}_3) - E(\vec{k}_1-\vec{k}_2+\vec{k}_3+\vec{C})) .$$

Вводя новые переменные

$$x = \beta(E(k_1) - \epsilon_f); \quad y = \beta(E(k_2) - \epsilon_f); \quad z = \beta(E(k_3) - \epsilon_f),$$

перепишем /30/ в виде

$$<\dot{\vec{P}}_j^{ee}; \dot{\vec{P}}_i^{ee}> = \beta^{-2} \cdot \iiint^{\beta(E_{max} - \epsilon_f)} dxdydz \frac{1}{e^x + 1} \cdot \frac{1}{e^{-y} + 1} \cdot \frac{1}{e^z + 1} \cdot \frac{1}{1 + e^{-x+y-z}} \times$$ /33/

$$\times F^1_{ji}\left(\frac{x}{\beta} + \epsilon_f, \frac{y}{\beta} + \epsilon_f, \frac{z}{\beta} + \epsilon_f\right) = \beta^{-2} A^{ee}_{ji}.$$

Поскольку считаем поверхность Ферми замкнутой, то при $\beta\epsilon_f \to \infty$ величина $\beta(E_{max} - \epsilon_f) \to \infty$. Использование этого обстоятельства в /33/ дает, что

$$<\dot{\vec{P}}_j^{ee}; \dot{\vec{P}}_i^{ee}> = A^{ee}_{ji} T^2 .$$

Итак, интеграл столкновений за счет электрон-электронного взаимодействия приводит к температурной зависимости T^2 /вне зависимости от конкретного вида функций $\Phi^1(\vec{k})$ /.

Рассмотрим далее вклад от электрон-фононного взаимодействия. Здесь температурная зависимость определяется бозевской функцией распределения $N(\vec{q}\nu)$. Учитывается только рассеяние на длинноволновых фононах. Электрон-фононное рассеяние с перебросом фононов затруднено, поскольку закон сохранения $\vec{q} = \vec{k}_2 - \vec{k}_1 - \vec{C}$ выполняется только для волновых векторов $q = q_{min}$, где q_{min} - минимальное расстояние в $\vec{k}$-пространстве для замкнутых поверхностей Ферми в расширенной зонной схеме. Замораживание вклада процессов с перебросом фононов пропорционально $[\exp(\beta\omega(q_{min}) - 1]^{-1}$. Напротив, для нормальных процессов закон сохранения квазиимпульса $\vec{k}_2 - \vec{k}_1 - \vec{q} = 0$ выполняется для любых, сколь угодно малых q. Это справедливо и для электрон-фононных процессов с перебросом в металлах с открытой поверхностью Ферми.

Найдем вклад нормальных процессов и процессов с перебросом при низких температурах. Для этого разложим подынтегральное выражение в $<\dot{\vec{P}}_j^{ep}; \dot{\vec{P}}_i^{ep}>$ /27/ по малым q. Для дебаевского приближения $\omega^\circ(\vec{q}\nu) = v_0^\nu (\vec{q}/q)$ /скорость v_0^ν может зависеть от углов θ_q и ϕ_q / разложение по малым q дает

$$g^\nu_{\vec{k}, \vec{k}+\vec{q}+\vec{G}} \approx q \cdot \left(\frac{\vec{q}}{q} \frac{\partial}{\partial \vec{k}'}\right) g^\nu_{\vec{k}\vec{k}'} \Big|_{\vec{k}' = \vec{k}} ,$$ /34/

$$B_1(\vec{k}, \vec{k} + \vec{q} + \vec{C}) \approx q \cdot \left(\frac{\vec{q}}{q} \frac{\partial}{\partial \vec{k}'}\right) B_1(\vec{k}, \vec{k}') \Big|_{\vec{k}' = \vec{k}} ,$$ /35/

$$\delta(E(\vec{k}+\vec{q}+\vec{C}) - E(\vec{k}) + \omega^{\circ}(\vec{q}\nu)) \approx \frac{1}{q}\delta\left(\frac{\vec{q}}{q}\frac{\partial E}{\partial \vec{k}} + v_0^{\nu}\right). \qquad /36/$$

При выводе /34/-/36/ учтено условие периодичности $E(\vec{k}+\vec{C}) - E(\vec{k})$. Подставим /34/-/36/ в /27/, получим

$$<\dot{\vec{P}}_j^{ep};\dot{\vec{P}}_i^{ep}> = m^2\beta\frac{\Omega^2}{(2\pi)^9}\sum_{\nu}\int_0^{q_{max}} q^5 dq\cdot\int\sin\theta_q d\theta_q\int d\phi_q \times \qquad /37/$$

$$\times(\exp\beta v_0^{\nu} q - 1)^{-1} F_{ji}^2(\theta_q,\phi_q),$$

$$F_{ji}^2(\theta_q,\phi_q) = \int d\vec{k}\left[\left(\frac{\vec{q}}{q}\frac{\partial}{\partial\vec{k}'}\right)g_{\vec{k}\vec{k}'}^{\nu}\Big|_{\vec{k}'=\vec{k}}\right]^2\cdot\left[\left(\frac{\vec{q}}{q}\frac{\partial}{\partial\vec{k}'}\right)B_j(\vec{k},\vec{k}')\Big|_{\vec{k}'=\vec{k}}\right]\times$$

$$\times\left[\left(\frac{\vec{q}}{q}\frac{\partial}{\partial\vec{k}'}\right)B_i(\vec{k},\vec{k}')\Big|_{\vec{k}'=\vec{k}}\right]f_{\vec{k}}(1-f_{\vec{k}})\,\delta\left(\frac{\vec{q}}{q}\frac{\partial E}{\partial\vec{k}} + v_0^{\nu}\right). \qquad /38/$$

Заметим, что пределы интегрирования в интеграле по k /38/ различны для нормальных процессов и процессов с перебросом. Производя замену переменных $x = \beta v_0^{\nu} q$, получим

$$<\dot{\vec{P}}_j^{ep};\dot{\vec{P}}_j^{ep}> = \beta^{-5}\frac{m\Omega^2}{(2\pi)^9}\sum_{\nu}\frac{1}{(v_0^{\nu})^6}\int_0^{\beta v_0^{\nu} q_{max}} dx\frac{x^5}{e^x - 1}\times \qquad /39/$$

$$\times\int\sin\theta_q d\theta_q\int d\phi_q F_{ji}^2(\theta_q,\phi_q) = A_{ji}^{ep} T^5.$$

Таким образом, интеграл столкновений за счет электрон-фононного взаимодействия приводит к температурной зависимости T^5 /вне зависимости от конкретного вида полиномов $\Phi^i(\vec{k})$. Необходимо отметить, что для открытых поверхностей Ферми последнее утверждение справедливо как для нормальных процессов, так и для процессов с перебросом. Для замкнутых поверхностей Ферми процессы с перебросом вымораживаются, и основной вклад в температурное поведение электросопротивления при низких температурах вносят нормальные процессы электрон-фононного рассеяния.

Подставим теперь /33/ и /39/ в /7/. Обобщенные кинетические уравнения примут вид:

$$\sum_{i=1}^{n}\vec{v}_j(A_{ji}^{ee}T^2 + A_{ji}^{ep}T^5) = e\vec{E}\,N_i. \qquad /40/$$

В дальнейшем, для простоты, рассмотрим случай, когда можно ограничиться только двумя параметрами v_1 и v_2. Это означает, что рассматривается только сдвиг центра тяжести и однородная деформация поверхности Ферми. Учет большего числа параметров

не вносит качественных изменений. Тогда из /11/ с учетом /40/ получаем для электросопротивления

$$R=\frac{\Omega}{3e^2}\cdot\frac{(A_{11}^{ee}T^2+A_{11}^{ep}T^5)(A_{22}^{ee}T^2+A_{22}^{ep}T^5)-(A_{12}^{ee}T^2+A_{12}^{ep}T^5)^2}{N_1^2(A_{22}^{ee}T^2+A_{22}^{ep}T^5)+N_2^2(A_{11}^{ee}T^2+A_{11}^{ep}T^5)-2N_1N_2(A_{12}^{ee}T^2+A_{12}^{ee}T^5)}. \qquad /41/$$

В случае преобладания одного из механизмов рассеяния температурное поведение $R(T)$ /41/ будет определяться одной из зависимостей T^2 или T^5. Например, если $A_{ji}^{ee}\approx 0$, то из /40/ следует, что

$$R=\frac{\Omega}{3e^2}\,\frac{(A_{11}^{ep}A_{22}^{ep}-A_{12}^{ep})T^5}{N_1^2A_{22}^{ep}+N_2^2A_{11}^{ep}-2N_1N_2A_{12}^{ep}}\,. \qquad /42/$$

С другой стороны, если пренебречь деформацией, т.е. положить $v_2=0$, то из /41/ имеем

$$R=\frac{\Omega}{3e^2N_1^2}(A_{11}^{ee}T^2+A_{11}^{ep}T^5)\,. \qquad /43/$$

6. ОБСУЖДЕНИЕ

В настоящей работе электросопротивление переходного металла вычислено из первых принципов на основе метода НСО. Использование гамильтониана однозонной модели БЛФ[19] позволило записать функции A_{ji}^{ee} и A_{ji}^{ep} через небольшое число характерных параметров переходного металла: U, q_0, t, М.При учете сдвига несферической поверхности Ферми и ее деформации под действием внешнего электрического поля, получена существенно новая формула для электросопротивления /41/. Таким образом, развитая теория позволяет последовательно учесть вклад электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий в температурную зависимость электросопротивления для реалистической модели переходного металла.

В связи с полученным выражением /41/ необходимо также отметить следующее. Обычно измеряемое на опыте низкотемпературное электросопротивление пытаются описать на основе следующего выражения:

$$R(T)\sim A+BT^2+CT^3+DT^5\,. \qquad /44/$$

Зависимость /44/ соответствует правилу Маттисена. Различные вклады в /44/ соответствуют различным механизмам рассеяния электронов. Как уже упоминалось выше, для многих простых металлов и для переходных металлов правило Маттисена не выполняет-

ся. В очень детальном исследовании этой проблемы [12] отмечается, что использование простых моделей и степенного закона /44/, не может объяснить наблюдаемую на опыте температурную зависимость электросопротивления. В работе [12] электросопротивление Nb и Pd вычислялось на основе вариационного принципа для уравнения Больцмана. Матричные элементы вычислялись на основе расчета энергетической зонной структуры этих металлов. Было показано, что низкотемпературное поведение Pd точно описывается законом T^2. По утверждению авторов работы [12], появление члена T^3, данное в работе [5] для Nb, не может считаться твердо установленным.

Таким образом, исследование электросопротивления переходных металлов в работе [12], проведенное в рамках иного, чем наш, подхода, согласуется с выводами настоящей работы о том, что главный вклад в низкотемпературное поведение электросопротивления вносят зависимости $(BT^2 + DT^5)$, Поскольку их вклад в электросопротивление задается в виде дроби /41/, это позволяет получать зависимости, отличные от простого степенного закона /44/. Интересно отметить, что подобные по структуре выражения для электросопротивления /в виде отношения функций вида $(a + bT)$ / получаются для металлов с сильным рассеянием, таких, как, например, соединение со структурой A15 Nb_3Sn [32].

Развитая теория электропроводности может быть усовершенствована, если учесть межзонное рассеяние /напр., s-d рассеяние/ и увлечение фононов. Обобщение развитого подхода для вычисления электросопротивления неупорядоченных сплавов переходных металлов также составляет весьма интересную задачу.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Эквивалентность обобщенных кинетических уравнений и формулы Кубо

Покажем, что обобщенные кинетические уравнения /7/ содержат формулу Кубо как частный случай. Запишем /7/ в виде

$$\sum_n F_n \{ \frac{1}{i} Sp(\rho [P_n, P_m]) + < \dot{P}_n ; \dot{P}_m > \} =$$
$$= \frac{eE}{m} \{ Sp(\rho \vec{P}_e (-i\lambda) P_m) + < \vec{P}_e ; \dot{P}_m \} , \qquad /A.1/$$

где $\vec{P}_e$ - полный импульс электронов. Предположим, что существует набор коэффициентов $\vec{a}_i$ такой, что можно построить оператор импульса $\vec{P}_e$ и оператор плотности тока $\vec{j}$ следующим образом:

$$\vec{P}_e = \sum_i \vec{a}_i P_i ; \quad \vec{j} = \frac{e}{m\Omega} \vec{P}_e . \qquad /A.2/$$

Интегрируя корреляционные функции в /А.1/ по частям, получим

$$\sum_n F_n \{ \int_0^\beta d\lambda \, Sp(\rho P_n(-i\lambda) P_m) - \eta \langle P_n ; P_m \rangle \} = \qquad /A.3/$$

$$= \frac{eE}{m} \langle \vec{P}_e ; P_m \rangle .$$

Предполагается, что при предельном переходе $\eta \to 0$ корреляционная функция $\langle P_n ; P_m \rangle$ остается конечной. Это требование есть в некотором смысле граничное условие кинетического уравнения для корреляционных функций /А.1/. В результате предельного перехода $\eta \to 0$ из /А.3/ с учетом /А.2/ получаем

$$\sum_{nm} \vec{a}_m F_n \int_0^\beta d\lambda \, Sp\{\rho P_n(-i\lambda) P_m\} = \frac{eE}{m} \langle \vec{P}_e ; \vec{P}_e \rangle . \qquad /A.4/$$

Из /А.4/ следует, что

$$\sum_n F_n \int_0^\beta d\lambda \, Sp\{\rho P_n(-i\lambda) \vec{P}_e\} = \frac{eE}{m} \langle \vec{P}_e ; \vec{P}_e \rangle . \qquad /A.5/$$

Учитывая определение /10/, получим из /А.5/

$$\vec{j} = \frac{e^2 E}{3m^2 \Omega} \langle \vec{P}_e ; \vec{P}_e \rangle . \qquad /A.6/$$

Выражение /А.6/ совпадает с формулой Кубо [20]. Таким образом эквивалентность обобщенных кинетических уравнений /7/ и формулы Кубо доказаны.

ЛИТЕРАТУРА

1. Blatt F.J. Physics of Electronic Conduction in Solids. Mc Graw-Hill Book Company, 1968, Ch.7.
2. Appel J. Phil.Mag., 1963, 8, p.1071.
3. Rice M.J. Phys.Rev.Lett., 1968, 20, p.1439.
4. Herring C. Phys.Rev.Lett., 1967, 19, p.167.
5. Webb G.W. Phys.Rev., 1969, 181, p.1127.
6. Wagner D.K., Garland J.C., Bowers R. Phys.Rev., 1971, D3, p.3141.
7. Laubitz M.J., Matsumura T. Can.J.Phys., 1973, 51, p.1247.
8. Laubitz M.J., Matsumura T., Kelly P.J. Can.J.Phys., 1976, 54, p.92.
9. Johnson P.B., Kimball J.C., Goodrich R.G. Phys.Rev., 1976, B14, p.3282.
10. Ruthruff T.L., Grenier C.G., Goodrich R.G. Phys.Rev., 1978, B17, p.3070.
11. Potter C., Morgan G.J. J.Phys., 1979, F9, p.493.

12. Pinski F.J., Allen P.B., Butler W.H. Phys.Rev., 1981, B23, p.5080.
13. Hubbard J. Proc.Roy.Soc., 1963, A276, p.238.
14. Christoph V., Röpke G., Schiller W. phys.stat.sol.(b), 1975, 72, p.K49.
15. Marsch.E.J.Phys., 1976, C9, p.L117.
16. Nolting W. phys.stat.sol.(b), 1975, 70, p.505.
17. Ihle D. phys.stat.sol.(b), 1977, 80, p.619.
18. Бровман Е.Г., Каган Ю.М. УФН, 1974, 112, с.369.
19. Barisic S., Labbe J., Friedel J. Phys.Rev.Lett., 1970, 25, p.919.
20. Zubarev D.N. Statistische Thermodynamic des Nichtgleichhewichts Akademie-Verlag, Berlin, 1976.
21. Kuremsky A.L., Pashkevich T. Acta Phys.Pol., 1971, A40, p.205.
22. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. Гостехтеориздат, М.-Л., 1946.
23. Röpke G., Christoph V. J.Phys., 1975, C8, p.3613.
24. Christoph V., Röpke G. phys.stat.sol., 1977, 80, p.K117.
25. Mobius A., Goedsche F., Vojta G. Physica, 1979, 95A, p.294.
26. Garcia-Moliner F. Proc.Roy.Soc., 1958, A249, p.73.
27. Bross H. Z.Phys., 1966, 193, p.185.
28. Каган Ю.М., Флеров Г.Н. ЖЭТФ, 1974, 66, с.1374.
29. Allen P.B. Phys.Rev., 1978, B17, p.3725.
30. Pinski F.J. Phys.Rev., 1980, B21, p.4380.
31. Холас А., Плакида Н.М., Куземский А.Л. ОИЯИ, Р17-80-741, Дубна, 1980.
32. Allen P.B., Chakraborty B. Phys.Rev., 1981, B23, p.4815.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 октября 1981 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д1,2-9224	IV Международный семинар по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1975.	3 р. 60 к.
Д-9920	Труды Международной конференции по избранным вопросам структуры ядра. Дубна, 1976.	3 р. 50 к.
Д9-10500	Труды II Симпозиума по коллективным методам ускорения. Дубна, 1976.	2 р. 50 к.
Д2-10533	Труды X Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Баку, 1976.	3 р. 50 к.
Д13-11182	Труды IX Международного симпозиума по ядерной электронике. Варна, 1977.	5 р. 00 к.
Д17-11490	Труды Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1977.	6 р. 00 к.
Д6-11574	Сборник аннотаций XV совещания по ядерной спектроскопии и теории ядра. Дубна, 1978.	2 р. 50 к.
Д3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
Д13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
Д1,2-12036	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
Р18-12147	Труды III Совещания по использованию ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1978.	2 р. 20 к.
Д1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
Р2-12462	Труды V Международного совещания по нелокальным теориям поля. Алушта, 1979.	2 р. 25 к.
Д-12831	Труды Международного симпозиума по фундаментальным проблемам теоретической и математической физики. Дубна, 1979.	4 р. 00 к.
Д4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
Д4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
Д11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
Д2-81-158	Труды XIV Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий, Дубна, 1980	3 р. 50 к.

Кристоф Ф., Куземский А.Л. P17-81-630

Электропроводность в модели переходного металла с несферической поверхностью Ферми

Развита теория электропроводности для однозонной модели переходного металла, позволяющей учесть реальный спектр сильно связанных электронов и электрон-фононное взаимодействие. С помощью метода неравновесного статистического оператора получено общее выражение для электросопротивления через корреляционные функции. При учете сдвига поверхности Ферми и ее деформации получено существенно новое выражение для температурной зависимости электросопротивления при низких температурах.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1981

Christoph V., Kuzemsky A.L. P17-81-630

Electroconductivity for the Model of Transition Metals with the Nonspherical Fermi Surface

The theory of electroconductivity for the one-band model of the transition metal is developed. The electron-electron interaction in the framework of the Hubbard model and the electron-phonon interaction are taken into consideration. The generalized kinetic equations are obtained by the nonequilibrium statistical operator method for the nonspherical Fermi surface. At low temperatures an essentially new formula for the resistivity is obtained.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1981

Перевод авторов.

Редактор Б.Б.Колесова. Макет Т.Е.Жильцовой.
Набор В.С.Румянцевой, Е.М.Граменицкой.

Подписано в печать 27.10.81.
Формат 60x90/16. Офсетная печать. Уч.-изд.листов 1,27.
Тираж 410. Заказ 30298.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.
Дубна Московской области.